

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Горбунова Дмитрия Евгеньевича

на тему: «Теоретический анализ электронной структуры и магнитных свойств органических радикалов, дирадикалов и комплексов меди с ними», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 — Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Известно, что в настоящее время ведётся серьёзный поиск и изучение свойств материалов, способных существенно модифицировать и улучшать оптоэлектронные комплексы и лазерные схемы. При этом особый акцент отводится именно структурам с уникальными магнитными и электронными свойствами. В этой связи тема работы, цель исследования, решаемые задачи, проведенные вычислительные эксперименты и их объяснение, актуальны, своевременны и востребованы.

Поставленная цель работы, а именно: «...объяснение на молекулярном уровне с использованием результатов высокоточных квантово-химических расчётов магнитных свойств серии стабильных радикалов, дирадикалов и их комплексов с катионами меди...» — показывает комплексность подхода и его междисциплинарность.

Решаемые задачи, связанные с целью работы, логично сформулированы, подкреплены DFT-расчётами и рядом аналитических построений. Основная часть автореферата и выводы в заключении существенно расширяют наши материаловедческие знания, а также позволяют применять озвученный расчётный подход для обучения студентов.

Опубликованные работы автора диссертации, к примеру, статьи в Chem.Eur.J. and Chem.Asian.J. входят в квартиль Q1; Crystals – в квартиль Q2, что включены в базы данных Web of Science и Scopus.

Существенных замечаний по работе нет. В качестве рекомендаций следует отметить, что автор должен более внимательно подходить к обозначениям Латинских символов в автореферате, что должны быть наклонены. Например, на страницах 8, 11 параметр обменного взаимодействия не наклонён; на странице 11 символ числа парамагнитных центров также не наклонён; на страницах 16 и 19 не наклонён целый ряд латинских символов, др.

Считаю, что диссертационная работа Горбунова Дмитрия Евгеньевича по актуальности цели, способам решения задач, объёму проведённых расчётных исследований, степени научной новизны и практической значимости результатов полностью отвечает требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а её автор – Горбунов Дмитрий Евгеньевич, безусловно, заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук специальностям 1.3.17.

Наталья Владимировна Каманина

доктор физ.-мат.наук, ст.н.с., нач.отдела «Фотофизика
сред с нанообъектами» АО «ГОИ им.С.И.Вавилова»,
Кадетская линия В.О., д.5, корп.2, Санкт-Петербург, 199053.
Раб.тел.: +7 (812) 328 4608. Моб.тел. +7 911 981 1199;
электронный адрес: nvkamanina@mail.ru
Профессор кафедры «Фотоника» СПбЭТУ «ЛЭТИ»

Н.Каманина

27.11.2021

Согласовано: Директор по науке и инновациям АО «ГОИ им.С.И.Вавилова»

Л.Н.Архипова /Л.Н.Архипова/

